

体心立方多晶膜中应变能密度的各向异性分析^{*}

张建民¹⁾²⁾ 徐可为²⁾

¹⁾ 陕西师范大学物理学与信息技术学院, 西安 710062)

²⁾ 西安交通大学金属材料强度国家重点实验室, 西安 710049)

(2003 年 1 月 8 日收到, 2003 年 3 月 31 日收到修改稿)

根据弹性理论和多晶膜的屈服强度公式, 计算了附着在基体上体心立方多晶薄膜中不同取向晶粒中的应变能密度. 结果表明: 1) 在屈服之前, 对 Fe 和 Ta 两种薄膜, 4 个最小的应变能密度对应的晶粒取向依次为 (100) (510), (410) 和 (511); 对 Cr, Mo, Nb 和 V 四种薄膜, 4 个最小的应变能密度对应的晶粒取向依次为 (111) (332) (322) 和 (221); 对 W 膜, 应变能密度与晶粒取向无关. 2) 在屈服的体心立方多晶膜中, 4 个最小的应变能密度对应的晶粒取向依次为 (100) (111) (110) 和 (411). 从应变能的最小化考虑, 这些取向的晶粒将依次优先生长.

关键词: 体心立方多晶薄膜, 晶粒取向, 应变能密度, 织构

PACC: 6100, 6170A, 6185

1. 引 言

金属薄膜被广泛用于机械、电子、能源、信息等领域. 在所有这些应用中, 薄膜的物理、化学和力学性能与其微观结构(包括晶粒尺寸及分布、择优取向或织构)密切相关. 例如, 晶粒尺寸及其分布对 Al 膜的抗电迁移能力和电阻率具有重要影响^[1,2]. 在 Cu 的 (100) 面上形成氧化物^[3]或硅化物^[4]的速率比在 (111) 面上的大得多. Ag, Al 和 Cu 膜的 (100) 织构越强, 残余压应力越大, 电阻率越大; 反之 (111) 织构越强, 残余张应力越大, 电阻率越小^[5-9]. 1999 年, Leoni 等人对 TiN 和 (Ti, Cr)N 的研究也发现 (h00) 织构越强, 残余压应力越大的类似关系^[10]. 我们曾根据弹性理论, 对面心立方多晶膜中不同取向晶粒中的应力进行了计算, 成功地解释了这一应力-织构关系^[11].

薄膜的择优取向或织构取决于沉积条件和后处理(如退火)工艺^[12-15]. 如对面心立方结构的 Cu, Al 及其合金膜的实验结果发现, 主要的择优取向为 (100) (110) (211) 和 (511)^[16-18]. 我们曾用嵌入原子法 (EAM) 计算了 Cu 晶体的表面能, 结果表明: 对应其密排面 (111) 的表面能为最小^[19], 因此, 从表面能的最小化考虑, 其择优取向或织构应为 (111). 在

文献 [20] 中, 我们根据弹性理论^[21]和曾给出的多晶膜的屈服强度公式^[22], 计算了面心立方薄膜中不同取向晶粒中的应变能密度, 成功地解释了上述实验结果. 此外, 我们还以 Ag 和 Cu 自由膜和 Si 基体上的 Ag 和 Cu 附着膜为例进行了实验验证^[23].

有关体心立方薄膜的织构及性能的实验研究也有大量文献报道^[24-30]. 如 Ciurzynska 等人采用不同热处理方法对厚度为 60 μm 的 6.5% Si-Fe 薄膜的织构和磁性的研究发现, 经 1370K 退火 1h 后的择优取向从原来的自由取向变为 (100), 且对应的晶粒尺寸 d , 磁导率 μ 和矫顽力 H_c , 由原来的 10 μm , 280 和 250A/m 分别变为 200 μm , 1020 和 10A/m; 但经 1470K 退火 20min 后的择优取向则变为 (110), 对应的晶粒尺寸 d , 磁导率 μ 和矫顽力 H_c 分别为 250 μm , 460 和 25A/m^[29]. Harase 对 3% Si-Fe 薄膜择优取向的研究发现: 在体内的择优取向为 (100), 而在表面层的择优取向为 (110)^[30]. 对这些实验结果尚未给出令人满意的解释.

本文根据弹性理论和多晶膜的屈服强度公式, 对体心立方多晶膜中不同取向晶粒中的应变能密度进行了计算. 其结果除成功地解释了上述实验结果外, 还可用于预测体心立方多晶膜的织构及其织构相关的性能.

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 50271038, 59931010)资助的课题.

2. 弹性应变能密度

在弹性理论中,描述应力 σ_{kl} 与应变 ε_{ij} 关系的是著名的胡克定律^[21]

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl}, \quad (1)$$

其中 s_{ijkl} 为晶体的弹性柔度系数,每个下标可取 1, 2

$$a_{rs} = \begin{bmatrix} \frac{k}{\sqrt{h^2 + k^2}} & -\frac{h}{\sqrt{h^2 + k^2}} & 0 \\ \frac{hl}{\sqrt{h^2 + k^2}\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} & \frac{kl}{\sqrt{h^2 + k^2}\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} & -\frac{\sqrt{h^2 + k^2}}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \\ \frac{h}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} & \frac{k}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} & \frac{l}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

根据(2)和(3)式以及已知晶体的弹性柔度系数 s_{ijkl} ,可求出任一 (hkl) 取向的柔度系数.

根据应力、应变、和柔度系数 s_{ijkl} 的前两个下标和后两个下标的对称性,张量方程(1)可以简化为下列矩阵方程

$$\varepsilon'_j = s'_{ij}\sigma'_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, 6). \quad (4)$$

对方晶系,36个柔度系数 s_{ij} 中只有3个独立的分量,即 s_{11} , s_{12} 和 s_{44}

$$s_{ij}^{cub} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{12} & s_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} \end{bmatrix}. \quad (5)$$

根据变形协调性的要求,假设不同取向晶粒中

或3三个数,因此方程(1)为由9个方程构成的方程组,每个方程的右边为9项之和,81个柔度系数 s_{ijkl} 构成了一个四阶张量,并按下列关系转换^[21]

$$s'_{mnop} = a_{mi}a_{nj}a_{ok}a_{pl}s_{ijkl}, \quad (2)$$

其中转换矩阵 a_{rs} 依赖于晶粒取向 (hkl) ,对 (hkl) 晶面平行于膜面的晶粒,转换矩阵 a_{rs} 可以表示为^[20]

的应变相等,且假设膜中的应力为平面应力并忽略膜面内切应变的影响,可得在膜平面内两个相互垂直方向的应力分别为

$$\sigma'_1 = \varepsilon' \frac{s'_{12} - s'_{22}}{(s'_{12})^2 - s'_{11}s'_{22}}, \quad (6)$$

$$\sigma'_2 = \varepsilon' \frac{s'_{12} - s'_{11}}{(s'_{12})^2 - s'_{11}s'_{22}}. \quad (7)$$

根据弹性理论 (hkl) 取向晶粒中的应变能密度可以表示为^[21]

$$w' = \frac{1}{2} \sigma'_i s'_{ij} \sigma'_j. \quad (8)$$

把(6)和(7)式代入(8)式得

$$w' = \frac{(\varepsilon')^2}{2} \frac{2s'_{12} - s'_{11} - s'_{22}}{(s'_{12})^2 - s'_{11}s'_{22}}. \quad (9)$$

由(2)和(5)式,可以导出

$$s'_{11} = s_{11} \left\{ (a_{11})^4 + (a_{12})^4 + (a_{13})^4 \right\} + (2s_{12} + s_{44}) \times \left\{ (a_{11})^4 (a_{12})^2 + (a_{11})^2 (a_{13})^2 + (a_{12})^2 (a_{13})^2 \right\}, \quad (10)$$

$$s'_{12} = s_{11} \left\{ (a_{11})^2 + (a_{12})^2 + (a_{12})^2 (a_{22})^2 + (a_{13})^2 (a_{23})^2 \right\} + s_{12} \left\{ (a_{11})^2 (a_{22})^2 + (a_{11})^2 (a_{23})^2 + (a_{12})^2 (a_{21})^2 + (a_{12})^2 (a_{23})^2 + (a_{13})^2 (a_{21})^2 + (a_{13})^2 (a_{22})^2 \right\} + s_{44} (a_{12} a_{13} a_{22} a_{23} + a_{11} a_{13} a_{21} a_{23} + a_{11} a_{12} a_{21} a_{22}), \quad (11)$$

$$s'_{22} = s_{11} \left\{ (a_{21})^4 + (a_{22})^4 + (a_{23})^4 \right\} + (2s_{12} + s_{44}) \cdot \left\{ (a_{21})^2 (a_{22})^2 + (a_{21})^2 (a_{23})^2 + (a_{22})^2 (a_{23})^2 \right\}. \quad (12)$$

把由(3)式确定的与晶粒取向(hkl)有关的转换矩阵元 a_{ij} 和物理手册^[31]给出的体心立方金属(如 Cr, Fe, Mo, Nb, Ta, V 和 W)弹性柔度系数 s_{11} , s_{12} 和

s_{44} 值(见表1)分别代入(10)–(12)式,然后再代入(9)式,可求得体心立方金属薄膜中不同取向晶粒中的应变能密度,其结果列于表2中.

表1 体心立方金属的弹性柔度系数 s_{11} , s_{12} 和 s_{44} (单位: $10^{-12} \text{ m}^2/\text{N}$) 和各向异性因子 A ^[31]

	Cr	Fe	Mo	Nb	Ta	V	W
s_{11}	3.00	7.72	2.80	6.60	6.86	6.83	2.57
s_{12}	-0.43	-2.85	-0.78	-2.33	-2.58	-2.34	-0.73
s_{44}	9.92	9.02	9.10	34.80	12.12	23.48	6.60
A	0.69	2.42	0.77	0.51	1.56	0.78	1.00

表2 体心立方多晶膜中不同取向(hkl)晶粒中的相对应变能密度 $w^{(hkl)}$ (单位: 10^{10} J/m^3)

(hkl)	$w^{(hkl)}$						
	Cr	Fe	Mo	Nb	Ta	V	W
(100)	77.82	41.07	99.01	46.84	46.73	44.54	108.64
(110)	68.63	64.48	89.00	33.44	59.67	39.29	108.62
(111)	64.93	70.18	85.35	28.20	63.42	37.41	108.62
(210)	71.47	52.60	92.22	36.72	53.96	40.95	108.63
(211)	67.74	59.63	88.40	31.32	58.23	38.97	108.62
(221)	66.43	67.23	86.87	30.06	61.59	38.19	108.62
(310)	74.01	46.57	95.00	40.22	50.43	42.41	108.63
(311)	71.17	51.04	92.07	35.72	53.34	40.87	108.63
(320)	69.74	58.83	90.28	34.66	57.13	39.95	108.62
(321)	68.03	61.25	88.60	31.97	58.72	39.07	108.62
(322)	65.88	66.17	86.38	29.21	61.54	37.93	108.62
(331)	67.43	65.83	87.86	31.50	60.63	38.70	108.62
(332)	65.60	68.67	86.04	28.98	62.52	37.76	108.62
(410)	75.40	44.21	96.48	42.41	48.91	43.20	108.63
(411)	73.37	47.03	94.39	38.97	50.82	42.09	108.63
(421)	70.09	54.59	90.85	34.50	55.26	40.24	108.63
(510)	76.17	43.09	97.30	43.74	48.15	43.63	108.63
(511)	74.71	44.98	95.79	41.13	49.46	42.83	108.63

可以看出,不同取向晶粒中的应变能密度大小及变化趋势与各金属的弹性各向异性因子 A 的大小密切相关.1)对完全各向同性金属 $W(A=1)$,应变能密度与晶粒取向无关.2)不同取向晶粒中的应变能密度差随各金属弹性各向异性(即偏离1的程度)的增加而增加,Fe的不同取向晶粒中的应变能密度差最大,V的不同取向晶粒中的应变能密度差较小.3)对Fe和Ta两种金属($A>1$),应变能密度随晶粒取向的变化规律相同(111)取向晶粒中的应变能密度最大,(100)取向晶粒中的应变能密度最小,

其次依次为(510),(410)和(511).因此从应变能的最小化考虑,未屈服的Fe和Ta薄膜的择优取向或织构应依次为(100),(510),(410)和(511).4)对Cr,Mo,Nb和V四种金属($A<1$),应变能密度随晶粒取向的变化规律相同,其中(100)取向晶粒中的应变能密度最大,(111)取向晶粒中的应变能密度最小,其次依次为(332),(322)和(221)等.因此,仅考虑应变能,未屈服的Cr,Mo,Nb和V的择优取向或织构应依次为(111),(332),(322)和(221).

3. 屈服膜中的应变能密度

我们曾根据位错滑动的应力功和应变能关系导出了附着在基体上并有钝化层多晶膜的屈服强度公式^[22]

$$\sigma_y = \frac{\sin\varphi}{\cos\varphi\cos\lambda} \frac{b(1-\nu_f\cos^2\beta)}{2\pi(1-\nu_f)} \left[\frac{\mu_f\mu_t}{(\mu_f+\mu_t)h} \ln\left(\frac{\beta_1 t}{b}\right) + \frac{\mu_f\mu_s}{(\mu_f+\mu_s)h} \ln\left(\frac{\beta_s h}{b}\right) + \frac{\mu_f}{d\sin\varphi} \ln\left(\frac{d}{b}\right) \right]. \quad (13)$$

其中 φ 和 λ 分别为滑移面法线方向、位错柏氏矢量和膜面法线方向间的夹角, b 为位错的柏氏矢量, ν_f 为薄膜材料的泊松比, β 为柏氏矢量与位错线的夹角, μ_f , μ_t 和 μ_s 分别为薄膜、钝化层和基体的切变模量, h 和 t 分别为膜和钝化层的厚度, d 为柱状晶粒在膜平面内的直径, β_1 和 β_s 为依赖于钝化层和基体材料的数值常数.

晶粒取向对屈服应力的影响取决于取向因子

$c_{(hkl)} = \frac{\sin\varphi}{\cos\varphi\cos\lambda}$, 下标 (hkl) 表示特定的晶粒, 即晶粒的 (hkl) 晶面平行于膜面. 为便于讨论, 假设 $d = h$, 并令

$$G = \frac{b(1-\nu_f\cos^2\beta)}{2\pi(1-\nu_f)} \left[\frac{\mu_f\mu_t}{(\mu_f+\mu_t)} \ln\left(\frac{\beta_1 t}{b}\right) + \frac{\mu_f\mu_s}{(\mu_f+\mu_s)} \ln\left(\frac{\beta_s h}{b}\right) + \frac{\mu_f}{\sin\varphi} \ln\left(\frac{d}{b}\right) \right]. \quad (14)$$

表 4 体心立方多晶薄膜中晶粒取向因子的平均值 $C_{(hkl)}$

(hkl)	(100)	(110)	(111)	(210)	(211)	(221)	(310)	(311)	(320)
$C_{(hkl)}$	1.732	2.121	2.120	4.495	3.694	6.893	4.425	3.050	5.893
(hkl)	(321)	(322)	(331)	(332)	(410)	(411)	(510)	(511)	
$C_{(hkl)}$	4.423	5.553	7.510	8.103	4.954	2.830	5.630	2.902	

由 (15) 式知, 若对应 (hkl) 取向晶粒的取向因子平均值为 $C_{(hkl)}$, 则该晶粒的平均屈服应力为

$$\bar{\sigma}_{(hkl)} = C_{(hkl)} \frac{G}{h}, \quad (17)$$

那么, 对平面应力状态 (hkl) 取向晶粒中的应变能密度 $w_{(hkl)}$ 可以表示为

$$w_{(hkl)} = \frac{(\bar{\sigma}_{(hkl)})^2}{M_f} = \frac{C_{(hkl)}^2 \cdot G^2}{M_f \cdot h^2}. \quad (18)$$

其中 M_f 为薄膜材料的二轴弹性模量. 可见 (hkl) 取向晶粒中的应变能密度与该晶粒的取向因子平均值 $C_{(hkl)}$ 、膜厚 h 和弹性常数有关. 若仅考虑取向因子

那么 (13) 式简化为

$$\sigma_{(hkl)} = c_{(hkl)} \frac{G}{h}. \quad (15)$$

对体心立方金属, 原子排列最紧密的晶面是 $\{110\}$ 面, 原子排列最紧密的方向是 111 方向. 因此其滑移面为 $\{110\}$, 共有 6 个, 在每一个滑移面上有 2 个 111 滑移方向. 这些滑移面和滑移方向的组合构成了体心立方金属的 12 个滑移系, 列在表 3 中.

表 3 体心立方金属的 12 个滑移系

$[\bar{1}11] \{110\}$	$[1\bar{1}\bar{1}] \{101\}$	$[\bar{1}\bar{1}1] \{011\}$	$[111] \{\bar{1}\bar{1}0\}$	$[111] \{0\bar{1}\bar{1}\}$	$[111] \{10\bar{1}\}$
$[\bar{1}\bar{1}1] \{110\}$	$[\bar{1}\bar{1}1] \{101\}$	$[1\bar{1}\bar{1}] \{011\}$	$[1\bar{1}\bar{1}] \{\bar{1}\bar{1}0\}$	$[\bar{1}\bar{1}1] \{0\bar{1}\bar{1}\}$	$[\bar{1}\bar{1}1] \{101\}$

对一定的膜应力, 只有当其在某个滑移面内沿某个滑移方向上的分切应力达到(或超过)临界分切应力(CRSS)时, 这一滑移系才能开始动作. 不同取向的晶粒具有不同的分切应力. 根据体心立方晶体的滑移系的两个晶面 $(h_1 k_1 l_1)$ 和 $(h_2 k_2 l_2)$ 夹角 θ 的余弦公式

$$\cos\theta = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}, \quad (16)$$

我们计算了 17 个不同取向晶粒的取向因子 $c_{(hkl)} = \frac{\sin\varphi}{\cos\varphi\cos\lambda}$, 并对非无穷大值进行了算术平均(因无穷大表示在该滑移方向上的分切应力为零因而不能滑移), 其结果列在表 4 中.

的影响而忽略弹性各向异性(实际上 G 和 M_f 均与晶粒取向 (hkl) 有关)的影响, 由 (17) 和 (18) 式知, 对应取向因子平均值 $C_{(hkl)}$ 较小的晶粒中的屈服应力和应变能密度也较小.

由表 4 知, 对体心立方金属薄膜, 四个较小的取向因子平均值依次为 1.732、2.120、2.121 和 2.830. 它们对应的晶粒取向依次为 (100)、(111)、(110) 和 (411). 因此从应变能的最小化考虑, 屈服的体心立方薄膜的择优取向或织构应依次为 (100)、(111)、(110) 和 (411). 1992 年, Czurzynska 等人对厚度为 $60\mu\text{m}$ 的 6.5% Si-Fe 薄膜的磁性和择优取向进行了

不同热处理工艺研究. 结果发现, 经 1370K 退火 1h 后的择优取向从原来的自由取向(对应晶粒尺寸为 $10\mu\text{m}$) 变为(100)晶粒尺寸为 $200\mu\text{m}$), 而经 1470K 退火 20min 后的择优取向为(110)晶粒尺寸为 $250\mu\text{m}$]^{29]}. 这也许是因为(100)晶粒的取向因子平均值 1.732 最小, 对应的屈服应力和应变能密度最小, 因此在 1370K 退火时就优先生长. 在 1470K 退火 20min 后出现(110)择优取向的原因是因为(110)晶粒的取向因子平均值 2.121 比(100)晶粒的大, 屈服应力和应变能密度也比(100)晶粒的大, 因此在较高温度下才开始屈服和择优生长. 注意到(111)晶粒的取向因子平均值 2.120 稍低于(110)晶粒的值, 似乎第二个出现的择优取向应为(111)而不是(110). 这是因为对体心立方金属, 原子排列最紧密的面为(110), 对应(110)面的表面能最小, 因而(110)晶粒比(111)晶粒优先生长. Harase 的实验结果证明了这一点^[30]. 他对 3% Si-Fe 薄膜的研究发现: 在体内的择优取向为(100), 而在表面层的择优取向为(110).

因为对非柱状晶结构的薄膜, 只有分布在表面层的晶粒才受表面能的影响, 而对内部的晶粒只需考虑应变能.

4. 结 论

对附着在基体上的多晶薄膜, 由于薄膜和基体的热胀系数不同以及薄膜的厚度远小于基体的厚度. 当退火温度不同于沉积温度时, 薄膜中将会产生大的热应力, 使膜产生弹性甚至塑性变形. 除晶界能、表面能、膜-基界面能外, 应变能的各向异性对薄膜中的晶粒生长和织构变化也有一定影响. 从应变能的最小化考虑, 对体心立方薄膜, 在屈服之前, Fe 和 Ta 薄膜的择优取向或织构应依次为(100), (510), (410)和(511); Cr, Mo, Nb 和 V 四种薄膜的择优取向或织构应依次为(111), (332), (322)和(221). 在屈服的体心立方薄膜中, 其择优取向或织构应依次为(100), (111), (110)和(411).

- [1] Vaidya S and Sinha A K 1981 *Thin Solid Films* **75** 253
- [2] Cho J and Thompson C V 1989 *Appl. Phys. Lett.* **54** 2577
- [3] Young F W, Cathcart J V and Gwathmey A T 1956 *Acta Metal.* **4** 145
- [4] Chang C A 1990 *J. Appl. Phys.* **67** 566
- [5] Huang T C, Lim G, Parmigiani F and Kay E 1985 *J. Vac. Sci. Technol. A* **3** 2161
- [6] Roy R A, Cuomo J J and Yee D S 1988 *J. Vac. Sci. Technol. A* **6** 1621
- [7] Bai P, Yang G P and Lu T M 1990 *Appl. Phys. Lett.* **56** 198
- [8] Burnett A F and Cech J M 1993 *J. Vac. Sci. Technol. A* **11** 2970
- [9] Kim S P, Choi H M and Choi S K 1998 *Thin Solid Films* **322** 298
- [10] Leoni M, Scardi P, Rossi S, Fedrizzi L and Massiani Y 1999 *Thin Solid Films* **345** 263
- [11] Zhang J M, Xu K W and Vincent J 2001 *Appl. Surf. Sci.* **180** 1
- [12] Lee D N 1989 *J. Mater. Sci.* **24** 4375
- [13] Lee D N 1999 *J. Mater. Sci.* **34** 2575
- [14] Wang J, He J P, Yang D, Zhang H J, Yan C J and Jiang N 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1109 (in Chinese) [汪健、何江平、杨东、张寒洁、颜朝军、江宁 2000 物理学报 **49** 1109]
- [15] Li X L, Nie D, Dong C, Ma T C, Jin X and Zhang Z 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 115 (in Chinese) [李晓娜、聂冬、董闯、马腾才、金星、张泽 2002 物理学报 **51** 115]
- [16] Ohmi T, Saito T, Otsuki M and Shibata T 1991 *J. Electrochem. Soc.* **138** 1089
- [17] Tracy D P and Knorr D B 1993 *J. Electronic. Mater.* **22** 611
- [18] Longworth H P and Thompson C V 1991 *J. Appl. Phys.* **69** 3929
- [19] Zhang J M, Xu K W and Ma F 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1993 (in Chinese) [张建民、徐可为、马飞 2003 物理学报 **52** 1993]
- [20] Zhang J M and Xu K W 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2562 (in Chinese) [张建民、徐可为 2002 物理学报 **51** 2562]
- [21] Nye J F 1985 *Physical Properties of Crystals* (London: Oxford University Press) Chap 8
- [22] Zhang J M and Xu K W 2002 *J. Adv. Mater.* **34** 51
- [23] Zhang J M and Xu K W 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 145 (in Chinese) [张建民、徐可为 2003 物理学报 **52** 145]
- [24] Chapra K L 1969 *Thin Film Phenomena* (New York: McGraw-Hill Press) p220
- [25] Slaughter J M, Schulze D W, Hills C R, Mirone A, Watts R N, Tarrío C, Lucatorto T B, Krumrey M, Mueller P and Falco C M 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 2144
- [26] Scofield J H, Duda A, Albin D, Ballard B L and Predecki P K 1995 *Thin Solid Films* **260** 26
- [27] Fortunati S, Abbruzzese G and Di-Nunzio P E 1992 *Mater. Sci. Forum* **94-96** 431
- [28] Trogolo J A, Roy R A, Cuomo J J and Rajan K 1992 *Mater. Sci. Forum* **94-96** 537
- [29] Ciurzynska W, Zdrozyczny J, Wyslocki B, Moron J W, Szymura S and Yamashiro Y 1992 *Mater. Sci. Forum* **94-96** 425
- [30] Harase J 1992 *Mater. Sci. Forum* **94-96** 419
- [31] Gray D E 1972 *American Institute of Physics Handbook* (New York: McGraw-Hill Book Company Press) p2-51

Anisotropy analysis of strain-energy density in bcc-polycrystalline films *

Zhang Jian-Min¹) Xu Ke-Wei²)

¹) College of Physics and Information Technology, Shaanxi Normal University, Xi'an 710062, China)

²) State Key Laboratory for Mechanical Behavior of Materials, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(Received 8 January 2003 ; revised manuscript received 31 March 2003)

Abstract

Based on elastic theory and yield strength formula of polycrystalline films, the strain-energy densities in differently oriented grains have been calculated for a bcc-polycrystalline film on a substrate. The results show that, (1) prior to yielding, the Fe and Ta are basically similar and with (100), (510), (410) and (511) oriented grains having the lowest strain-energy densities. For Cr, Mo, Nb and V, however, the four lowest strain-energy densities correspond to the grains with (111), (332), (322) and (211) planes oriented parallel to the film surface. For isotropic W, the strain energy density is independent of the grain orientation. (2) In all of yielded bcc-polycrystalline films, the four lowest strain energy densities correspond to the grains with (100), (111), (110) and (411) planes oriented parallel to the film surface. Considering strain energy minimization, we predicate that the grains with these orientations should be favorable in crystal growth successively.

Keywords : bcc-polycrystalline films, grain orientation, strain-energy density, texture

PACC : 6100, 6170A, 6185

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50271038 and 59931010).